線形計画の新解法について(コードとデザインを中心とした組合せ数学)

刀根, 薫

数理解析研究所講究録
586巻 1986年 248-262

線形計画の新解法について

埼玉大政策研　刀根 薫　(Kaoru Tone)

線形計画の新解法として登場してきたN. Karmarkar(米AT&T, Bell研)の方法について解説する. この方法はいわゆる多項式オーダーの解法に属する. 1979年にKhachiyan(ソ連)によって発表された最初の多項式オーダーの解法(楕円体法)に比べてこのKarmarkarの方法(射影法と呼ぶ)の方が理論的にも数値解法上からもはるかに優れていることは確かである. しかしそれが従来からある単体法より良いかどうかについては未だ確定していない. 本人は「単体法より50~200倍は速い」と言っているが方法のアウトラインを発表しただけで, プログラムを公開しないので疑問視する向きも多い. 目下内外で研究が進行中である.

この稿では射影法の原理について解説するとともにその後内外で行なわれている研究動向についてもふれたいと思う.

1. 問題の背景

線形計画法（linear programming = LP とかく）の解法としては1947年にG.B. Dantzigによって発明された単体法（simplex method）が唯一の実用的な方法として約40年間にわたって用いられてきた．しかしよく知られているように単体法では計算量の上限が「変数や制約式の個数の多項式オーダー」で押さえられるという保証がない．ある特定のピボッティング規則に対して，可能解が構成する凸多面体のすべての頂点をたどらなければ最適頂点に到着できないような例題を作ることができ，そして凸多面体の頂点の数は変数や制約式の個数に関して組合せ的に増大するからである．したがって単体法は最悪の場合，指数オーダーの解法といわざるをえない．しかし実用上はそのようなケースが起ることはきわめて稀れで，制約式1万個，変数100万個といった大型問題も許容しうる時間内で解かれている．また理論的にも，単体法の平均的な計算量に関する研究が盛んになっており，S. Smale [9] をはじめとする最近の研究では平均的には多項式オーダーであることが指摘されている．しかしながらLPのような基本的な問題に対して指数オーダーの解法しかないということを計算機科学の汚点の1つと見る向きもあり理論家の好目標となっている．ところが，1979年にKhachiyanが楕円体法

〔6〕,〔2〕を発表し,LP に多項式オーダーの解法が存在することをはじめて世に示した.楕円体法は数値解法としては単体法に遠く及ばないことが判明し,したがって実用化されることはなかったが,理論的な意義は大きく,今回の射影法もその延長上に位置づけることもできる.

2. 射影法の基本 〔4〕,〔5〕,〔12〕

2.1 基本問題

次の問題を基本問題と呼ぶ.

$$
\text{(P)}\quad \begin{array}{ll}
\text{目的関数} & z = c^T x \to \text{最小化} \\
\text{制約条件} & Ax = 0 \\
 & e^T x = 1 \\
 & x \geq 0
\end{array}
\qquad (2.1)
$$

ここに $x \in R^n$,A は (m, n) 型定数行列,$e^T = (1, 1, \cdots, 1) \in R^n$,$c^T$ は定数ベクトル $c \in R^n$ の転置を表わす.

ただし基本問題は次の仮定を満足しているものとする.

仮定 1. z の最小値は 0 である.

2. $x^{(0)} > 0$ を満足する可能解が既知である.

3. $m \leq n$ で $\mathrm{rank}(A) = m$.

次に $D = \mathrm{diag}(x_1^{(0)}, \cdots, x_n^{(0)})$ を用いて射影変換 T を定義する.

$$
T: \quad x' = D^{-1}x \,/\, e^T D^{-1} x
$$

Tの逆変換は次の通りである.

$$T^{-1}:\ x = Dx'/e^{T}Dx'$$

この変換により次の射影問題を作る.

(P′)　目的関数 $z' = (Dc)^{T}x' \to$ 最小化

制約条件 $ADx' = 0$

$$e^{T}x' = 1$$

$$x' \geq 0$$

射影法の基本的な考え方は, (P)を直接解く代りに(P′)を解き, 逆変換によって元の問題に戻ることにある.

2.2 基本問題の解法

(2.1)式で定義された基本問題を解くために点列 $x^{(0)}, x^{(1)}, \cdots, x^{(k)}, \cdots$ を規則

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)})$$

により生成する. 一般に入力 $a = (a_1, \cdots, a_n)^{T}$ から出力 $b = \phi(a)$ を得る手順を次に示す. ただし $D = diag(a_1, \cdots, a_n)$, $a_0 = (1/n, \cdots, 1/n)^{T}$, $r = 1/\sqrt{n(n-1)}$ とする.

ステップ 1

$$B = \begin{bmatrix} AD \\ e^{T} \end{bmatrix}$$ とする.

ステップ 2

$$C_p = [I - B^{T}(BB^{T})^{-1}B]Dc$$ とする.

<u>ステップ 3</u>　　$\bar{c} = c_p / |c_p|$ とする.

<u>ステップ 4</u>　　$b' = a_0 - \alpha r \bar{c}$ とする.

ここに $\alpha \in (0, 1)$

<u>ステップ 5</u>　　$b = Db' / e^T D b'$ とする.

ここで以下用いる記号をまとめて記す.

$\Omega = \{x \in R^n \mid Ax = 0\}$（アフィン空間）

$\Omega' = \{x' \in R^n \mid ADx' = 0\}$（変換されたアフィン空間）

$S = \{x \in R^n \mid x \geq 0,\ e^T x = 1\}$（単体）

$S' = \{x' \in R^n \mid x' \geq 0,\ e^T x' = 1\}$（単体）

$a_0 = (1/n, \cdots, 1/n)^T$（$S'$の重心）

$r = \sqrt{1/n(n-1)}$（S'の内接球の半径）

$R = \sqrt{(n-1)/n}$（S'の外接球の半径）

$B(a_0, \alpha r)$：中心 a_0，半径 αr の球．$0 < \alpha \leq 1$

$F = \{x \in R^n \mid Ax = 0,\ e^T x = 1,\ x \geq 0\}$（(P)の可能領域）

$F' = \{x' \in R^n \mid ADx' = 0,\ e^T x' = 1,\ x' \geq 0\}$（(P')の可能領域）

$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \log\ (c^T x / x_i)$（ポテンシャル関数）

$f'(x') = \sum_{i=1}^{n} \log\ ((Dc)^T x' / x_i') - \sum_{i=1}^{n} \log a_i$（射影変換されたポテンシャル関数）

（解説）射影法は逐次反復法であるが，単体法と異なり内点法である．可能領域Fの内点 $x^{(k)}$ から次の $x^{(k+1)}$ に進むために一度問題を射影変換して(P′)の形にしそれをある意味で最適に解いてF′内の点を求めそれを逆変換によって再びFに戻し $x^{(k+1)}$ とする．射影変換Tにより問題(P)は次の形になる．

（目的関数） $(Dc)^T x' / e^T D x' \to$ 最小化

（制約条件） (P′)と同じ

この目的関数の分子だけを考慮したものが問題(P′)である．そのような置き換えをしても(P)とそれ程かけ離れないことを示すことができるのである．次に，反復 $b=\phi(a)$ の意味について述べる．変換Tにより入力点 a は単体S′の重心 a_0 に移る．そこで　$x' = a_0 + y$　とすると (P′)は

（目的関数） $z'' = (Dc)^T y \to$ 最小化

（制約条件） $ADy=0$ ， $e^T y = 0$ ， $a_0 + y \geq 0$

となる．ここでスカラー s を与えて， $y^T y = s^2$ とおいて，y について上の問題を解くと　$y = -\gamma[I - B^T(BB^T)^{-1}B]Dc$　となる．ここに γ は $y^T y = s^2$ となるように決める．ステップ2の c_p はこの逆方向であり，ステップ3でそれを正規化し，ステップ4で　$b' = a_0 - \alpha r \bar{c}$　$(0<\alpha<1)$ とすれば，b' は(P′)の可能領域内に止まり，球 $B(a_0, \alpha r)$ 上で (P′)の目的

関数を最小化する点であることがわかる．ステップ5で b' を逆変換 P^{-1} により F 上に戻す．この一反復に要する計算の手間は $O(n^3)$ である．ただし $O(n/m)=O(1)$ とする．

3. 射影法の収束

射影法の一反復 $b=\phi(a)$ によって(P)の目的関数は必ずしも減少するわけではない．しかしながらポテンシャル関数 $f(x)$ は確実に減少することを示すことができる．そして $f(x)\to-\infty$ となるので $c^Tx\to 0$ が成立することになる．

〔定理1〕

ステップ4により得られた b' は

(i) $(Dc)^T b'=0$

または

(ii) $f'(b')\leq f'(a_0)-\delta$

を満足する．ここに δ は α によって決る正定数であり，$\alpha=0.25$ のとき $\delta\geq 0.1$ である．

〔定理2〕

ステップ5により得られた b は

(i) $c^T b=0$

または

(ii) $f(b)\leq f(a)-\delta$

を満足する．ここに δ は α によって決る正定数であり，

$\alpha=0.25$ のとき $\delta \geq 0.1$ である.

[定理3] (主定理)

射影法を初期点 $x^{(0)}$ に対して適用するとき,

$O(n(q+\log n))$ 回以内の反復後に

(i) $c^T x=0$

または

(ii) $c^T x / c^T x^{(0)} \leq 2^{-q}$

を満たす可能解 x を見いだす.

(注: Karmarkar の原論文 [4], [5] では $O(n(q+\log n))$ となっているが, $O(nq)$ とすることができる. [10])

(解説) 以上の結果より射影法の計算(時間)複雑度に関して次の上限を得る.

1反復の複雑度 …… $O(n^3 q)$

反復回数の複雑度 … $O(nq)$

全体としての複雑度は $O(n^4 q^2)$ となる.

ただしこの複雑度は射影法を忠実に実行する場合のそれであって, Dの変化を観察しながら rank-one update を用いることにより1反復の複雑度を $O(n^{2.5} q)$ に下げることができるので本当の上限は $O(n^{3.5} q^2)$ であると Karmarkar はしている.

4. 一般のLPの場合

問題(P)は非常に特殊な形のLPであったが，一般のLP

(LP) $c^T x \to$ 最小化

制約 $Ax \geq b$, $x \geq 0$

は次の手順により(P)の場合に帰着させることができる．

ステップ1. 主・双対問題の結合

双対変数uを導入して次の等式・不等式系を作る．

$$Ax \geq b \quad , \; x \geq 0$$
$$A^T u \leq c \quad , \; u \geq 0$$
$$c^T x - b^T u = 0$$

双対定理よりこの結合問題に可能解があるのは，(LP)が有界な最適解をもつときかつそのときに限る．

ステップ2. スラック変数の導入

$$Ax - y = b, \quad x \geq 0, \; y \geq 0$$
$$A^T u + v = c \; , \quad u \geq 0, \; v \geq 0$$
$$c^T x - b^T u = 0$$

ステップ3. 人為変数λの導入

正の定ベクトル x_0, y_0, u_0, v_0 をもとに次のLPを考える．

$$\lambda \to \text{最小化}$$

制約 $Ax - y + (b - Ax_0 + y_0)\lambda = b$

$$A^T u + v + (c - A^T u_0 - v_0)\lambda = c$$

$$c^T x - b^T u + (-c^T x_0 + b^T u_0)\lambda = 0$$

$$x \geq 0,\ u \geq 0,\ y \geq 0,\ v \geq 0,\ \lambda \geq 0$$

この問題は $x = x_0,\ y = y_0,\ u = u_0,\ v = v_0,\ \lambda = 1$ という正の可能解をもつ．ステップ2の問題が可能解をもつとき，かつそのときのみ λ の最適値は 0 となる．

ここで記号を変更して，ステップ3の問題を次のように一般的に表わす．

$$c^T x \rightarrow \text{最小化} \qquad (x \in R^n)$$

制約　$Ax = b,\ x \geq 0$

ここに $x = a$ は既知の内点で可能解とする（$Aa = b$, $a > 0$）．目的関数の最小値は 0 である．

ステップ4．正領域を単体に移す射影変換

変換 $x' = T(x)$, $x \in R^n$, $x' \in R^{n+1}$ を次により定義する．

$$x_i' = \frac{x_i / a_i}{\sum_{j=1}^{n} (x_j / a_j) + 1} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

$$x_{n+1}' = 1 - \sum_{i=1}^{n} x_i'$$

また次の記号を定める：　$P_+ = \{x \in R^n \mid x \geq 0\}$，

$$\Delta = \{x \in R^{n+1} \mid x \geq 0,\ \sum_{i=1}^{n+1} x_i = 1\}$$

そのとき $T(x)$ は次の性質をもつ．

1.　T は P_+ を Δ 上に map する．

2.　対応は1対1で，逆は $x_i = a_i x_i' / x_{n+1}'$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$.

3. aの像は単体Δの重心

4. Aの第i列をA_iとすれば

$$\sum_{i=1}^{n} A_i x_i = b \rightarrow \sum_{i=1}^{n} a_i A_i x_i' - b x_{n+1}' = 0$$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{n+1} A_i' x_i' = 0 \quad (ここに\ A_i' = a_i A_i,\ A_{n+1}' = -b)$$

こうして変換された空間内での同次の1次方程式系を得る.

ステップ5. 基本問題への変形

いま $Z = \{x \in R^n \mid c^T x = 0\}$ とすれば Tにより Zは

$$Z' = \{x' \in R^{n+1} \mid c'^T x' = 0\} \ (ここに\ c_i' = a_i c_i\ (i=1,\cdots,n),\ c_{n+1}' = 0)$$

に変換される. よって次の基本問題に帰着する.

$$c'^T x' \rightarrow 最小化$$

制約 $A' x' = 0$, $\sum_{i=1}^{n+1} x_i' = 1$, $x' \geq 0$

ここで, 単体の重心は可能点である.

(解説) 上記の変形によりどの形のLPも基本問題に帰着できる. そして射影法によって解くことができる. また, 不能な場合や目的関数値が有界でない場合の判定も行なうことができる. しかし上の変形は"理論的"な方法を示したもので"数値計算上"は好ましいものではない. 問題のサイズを拡大するからである. 実際には元のLPのサイズで解くためにさまざまな工夫がなされている.

5. Karmarkar 以後の研究動向

Karmarkarがプログラムを公開せずに計算結果のみを宣伝するので多くの人が射影法の本当の価値について疑問をもつのも無理からぬことである．理論面での貢献は大きいとして数値計算法として単体法との比較が問題となっている．射影法をそのまま実行したのでは単体法に遠く及ばないことは実証されている．しかし多くの点で改良の余地がある．とくに，射影ベクトル C_p 計算の簡略化，直線探索の導入，問題の縮小化，双対問題の導入などである．また射影法に刺激されて内点法が再認識される動きも出ている．さらに，この分野の計算に並列処理の機構が利用できる可能性も開かれたと見る向きもある．

以下，Karmarkar 以後の主要な動向を記す．

(1) Charnes et al. [1]

Karmarkar法を忠実に実行すると1次収束であることを例証した．

(2) Tomlin [11]

数値計算を行ない，通常の手段では射影法が単体法に及ばないことを示した．スパース行列の処理，悪条件問題への対応，projection matrixの計算など多くの問題点があることを指摘している．射影法を Phase I の処理に使うメリットを

示唆している。

(3) Todd et al. [10]

双対問題と双対解を導入して，射影法を従来の数理計画の枠組の中でとらえることに成功している。また一般LPへの適用法の改良，とくに目的関数の下界値の更新に新方式を提案している。計算例はない。

(4) 伊理他 [3]

ニュートン法をLPに適用した内点法である。大域的に1次収束，局所的に超1次収束である点が特色。射影変換などは用いない。数値例あり。

(5) 刀根 [13]

射影法に基底を導入しReduced Gradient法を適用する。このことにより最適基底解が得られる。射影法自体よりははるかに高速。数値例あり。

(6) 小島 [7]

射影法にReduced Gradient法とConjugate Gradient法を導入して高速化を実現した。問題の縮小化にもある程度成功している。数値例あり。

(7) Shanno [8]

Sparsityを考慮した射影法のimplementationに成功している。数値例あり。

参考文献

[1] A. Charnes, T. Song and M. Wolfe, "An explicit solution sequence and convergence of Karmarkar's algorithm," Research Report CCS 501, University of Texas at Austin, 1984.

[2] 伊理正夫, "線形計画法の計算複雑度", オ1回数理計画シンポジウム論文集, 1980.

[3] 伊理正夫, 今井浩, "A multiplicative penalty function method for linear programming", オ6回数理計画シンポジウム論文集, 1985.

[4] N. Karmarkar, "A new polynomial-time algorithm for linear programming", Proceedings of 16 th Annual ACM Symposium on Theory of Computing, Washington D.C., 1984.

[5] N. Karmarkar, "A new polynomial time algorithm for linear programming", Combinatorica 4, 373-395, 1984.

[6] L.G. Khachiyan, "A polynomial algorithm in linear programming", Doklady Academia Nauk SSSR 244: S 1093-1096, 1979, translated in Soviet Mathematics Doklady 20:1, 191-194, 1979.

[7] 小島政和, "Karmarkar法の改良について", オ6回数理計画シンポジウム論文集, 1985.

[8] D. F. Shanno, "Computing Karmarkar projections quickly", Working Paper 85-10, Graduate School of Administration, University of California, Davis, 1985.

[9] S. Smale, "On the average number of steps of the simplex method of linear programming", Mathematical Programming 27, 241-262, 1983.

[10] M. J. Todd and B. P. Burrell, "An extension of Karmarkar's algorithm for linear programming using dual variables", T. R. 648, Dept. of Operations Research, Cornell University, 1985.

[11] J. A. Tomlin, "An experimental approach to Karmarkar's projective method for linear programming", Ketron, Inc., 1985.

[12] 刀根 薫, Karmarkarの新LP解法(1),(2). オペレーションズ・リサーチ Vol.30, No.3, No.4, 215-220, 271-277, 1985.

[13] 刀根 薫, "A hybrid method for linear programming", Research Report 85-B-1, Institute for Policy Science, Saitama University, 1985. (Part Iのみ 第6回数理計画シンポジウム論文集, 1985に収録)